

концентрации не удалось получить. Также, в ходе работы определили, что для каждого электролита существует своя критическая концентрация, при которой происходит быстрое структурирование системы, и, регулируя концентрацию электролита и его состав, можно получить более прочный гель с заранее заданными свойствами. Также, в дальнейшем планируется проведение анализа на микробиологическую активность получаемых гидрогелей на основе биоактивных металлов.

1. Pakhomov P.M., et al. Study of gelation in aqueous solution of cysteine and silver nitrate //Colloid Jornal. 2004. V. 66, No 1. P. 65.

2. Спиридонова В.М., Савельева В.С., Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. Гидрогель на основе L-цистеина и нитрата серебра как основа лекарственных новых препаратов //Ползуновский вестник 3. 2009. с. 324-327.

3. Овчинников М.М., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Физико химия полимеров. Тверь, 2008. Вып. 14. С. 186.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» (2009–2010 гг.), проект № 2.1.1/6867.*

## **ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ ВНХ-Л-21 И ПРОЦЕССА ЕГО АГРЕГАЦИИ В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

*Каменщикова С.А., Широбоков И.Б.*

Удмуртский государственный университет  
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1

Практика использования ингибиторов атмосферной коррозии показывает, что некоторые из них проявляют защитные свойства водной среде. Одним из таких ингибиторов является разработанный ОАО «ВНИИНефтехим» (г. Санкт-Петербург) ингибитор атмосферной коррозии ВНХ-Л-21.

Процесс взаимодействия данного ингибитора с водной средой изучали с использованием метода молекулярной динамики (МД), который включал в себя ряд этапов:

- 1) создание файлов топологии (\*.itp и \*.top) и файла предварительной геометрической структуры изучаемой молекулы;
- 2) МД расчёт одиночной молекулы без учёта зарядов;
- 3) на базе полученной конфигурации одиночной молекулы расчёт зарядов на атомах в молекуле;

4) окончательный расчёт геометрии молекулы с учётом зарядов;

5) расчёт ассоциации ингибитора в водной среде в зависимости от концентрации и температуре.

Для расчёта геометрии одиночной молекулы (без учета зарядов на отдельных атомах) были созданы три основных файла, содержащих информацию о предварительной геометрии и видах связи между атомами в изучаемой молекуле с использованием силового поля OPLSAA. Выполненный МД расчет позволил получить конфигурацию молекулы, пригодную для расчета парциальных зарядов на атомах в молекуле. Расчет парциальных зарядов осуществляли с использованием программы FireFly (v.7.1.G) с использованием *ab initio* методов расчета. Полученные заряды на отдельных атомах были использованы в исходном файле топологии (\*.itp), что позволило выполнить завершающий МД расчет изучаемой молекулы, но теперь уже с учетом зарядов на отдельных атомах. Отдельный расчёт геометрии молекулы с учётом зарядов позволяет выяснить более энергетически выгодную конформацию молекулы.

Также были проведены исследования степени агрегатирования данного ингибитора в воде при различных условиях. В процессе работы изучались системы с различной степенью соотношения между числом молекул ингибитора и числом молекул воды: от 1:46 до 1:1419. Число молекул модельного ингибитора во всех изученных системах составляло 216. В работе использовали NVT ансамбль. Системы представляли собой кубические ячейки, на которые были наложены периодические граничные условия. Время эволюции системы – 6 нс. Системы считались при трёх различных температурах: 298K, 330K и 373K. Анализ результатов расчетов модельных систем позволил определить числа агрегации молекул ингибитора в водном растворе при различных температурах. Опыт показывает, что при разбавлении размер агрегатов уменьшается, а число их увеличивается. В самых разбавленных системах можно наблюдать рост числа одиночных молекул ингибитора. Повышение температуры приводит к разрушению агрегатов из молекул ингибитора. Температурная зависимость чисел агрегации от температуры позволяет рассчитать термодинамику процесса агрегации молекул ингибитора.